

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации
Тихонова Дениса Сергеевича
на тему: *«Исследование структуры и внутренней динамики свободных молекул с плоскими и сферическими ароматическими ядрами методом газовой электронографии»*,
представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия»

Диссертационная работа Тихонова Дениса Сергеевича направлена на исследование пространственного строения и динамики небольшого, но представительного ряда ароматических молекул методом газовой электронографии. Предоставляемые именно этим трудоемким, исключительно информативным и точным газофазным методом экспериментальные данные часто принимаются в физико-химической науке как истинное пространственное строение изолированных молекул. Данные газовой электронографии, в частности, о длинах межатомных химических связей служат надежным ориентиром для теоретической химии как для оценки адекватности неэмпирических квантово-химических методов, так и для калибровки параметров полуэмпирических моделей. Установление любых параметров микромира может быть достигнуто только сквозь призму модельных представлений, поэтому задачи совершенствования теоретических моделей и методов обработки экспериментально измеренных величин, выполненные соискателем в рамках диссертационной работы, представляются актуальными. В качестве объектов исследования выбраны молекулы, представляющие определенные трудности для теоретического квантово-химического описания, обусловленные слабовыраженным характером локальных и глобальных минимумов на многомерной поверхности потенциальной энергии.

Научная и практическая значимость работы подтверждается получением в ходе исследования интересных и важных результатов, в частности: разработана методология оценки количества теоретической информации, содержащейся в молекулярных параметрах, получаемых из структурного анализа.

К достоинствам данной работы можно отнести применение современных методов квантовой химии: методы возмущения второго порядка Мёллера-Плессе MP2(full), MP2(fc), функционалы плотности BP86, B3LYP с корреляционно-согласованными базисным наборами Даннинга двойного (cc-pVDZ) и тройного (cc-pVTZ) валентного расщепления, вариант последнего с эффективным потенциалом ядра в реализации Штутгарт-Дрезден-Бонновский (SDB-cc-pVTZ), базисы Альриха серии def2, а также малый базис Попла двухкратного валентного расщепления 3-21G.

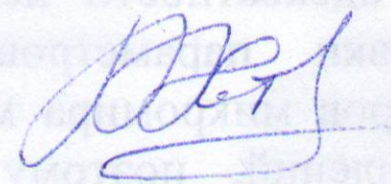
Материалы диссертационного исследования прошли апробацию и были опубликованы в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК, а также отражены в докладах всероссийской и международной конференций.

Вместе с тем имеется следующее замечание, возможно, дискуссионного характера. Несколько неожиданным выглядит вывод о том, что в

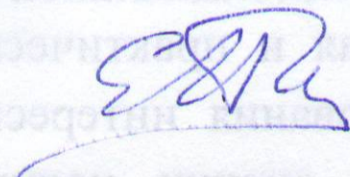
нитропроизводных бензола группа NO_2 слабо сопряжена с ароматическим кольцом. Хорошо известно, что появление нитрогруппы в структуре бензола оказывает существенный стабилизирующий эффект на граничные орбитали, о чем (в рамках теоремы Купманса) свидетельствует возрастание энергии ионизации и электронного сродства при переходе от бензола к нитробензолу.

В целом, Тихоновым Д.С. выполнена интересная, актуальная и ценная для фундаментальной науки работа. Диссертационная работа Тихонова Д.С. на тему «Исследование структуры и внутренней динамики свободных молекул с плоскими и сферическими ароматическими ядрами методом газовой электронографии» соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Хатымов Рустем Владиславович,
канд. физ.-мат. наук (специальность 01.04.17),
старший научный сотрудник лаборатории масс-
спектрометрии отрицательных ионов и
спектроскопии молекул, Институт физики
молекул и кристаллов Уфимского научного
центра Российской Академии наук



Панкратьев Евгений Юрьевич,
канд. хим. наук (специальности 02.00.15,
02.00.04), и.о. научного сотрудника лаборатории
масс-спектрометрии отрицательных ионов и
спектроскопии молекул, Институт физики
молекул и кристаллов Уфимского научного
центра Российской Академии наук



Почтовый адрес : 450075, Республика
Башкортостан,
г. Уфа, пр-т Октября 151, 4 этаж
Телефон: (347)2848869
E-mail: rustem@anrb.ru

Подписи Хатымова Р.В. и Панкратьева Е.Ю. заверяю
Зав. канцелярией Иванова А.Д.



01.04.2017г.